

TRABAJO FIN DE MÁSTER

Desarrollo de un algoritmo de simulación geométrico para modelos de gauge acoplados a un campo de Higgs

Autor:

EDUARDO ROYO
AMONDARAIN

Directores:

VICENTE AZCOITI PÉREZ
EDUARDO FOLLANA ADÍN

Máster en Física y Tecnologías Físicas

Zaragoza, Junio 2014

FACULTAD DE CIENCIAS



Universidad
Zaragoza

Resumen

En este trabajo se plantea como objetivo la implementación de un algoritmo de simulación geométrico para el modelo Z_2 gauge-Higgs. Tras una exposición de los resultados relevantes en el campo, se introduce el modelo de estudio y se prueba su dualidad con el modelo de Ising con campo magnético en $d = 2$. Posteriormente se describe en detalle el funcionamiento de los algoritmos implementados y se presentan los resultados obtenidos por estos, incluyendo una comparativa de la eficiencia computacional de cada uno. Adicionalmente, se estudia el modelo de Ising en su sector antiferromagnético, corroborando la existencia de una línea de transición que persiste para valores del campo no nulos, a diferencia del caso ferromagnético.

Índice

1. Introducción	1
2. Fundamentos teóricos	3
2.1. El modelo Z_2 gauge-Higgs	3
2.2. Caso $d = 2$: Dualidad con el modelo de Ising	6
2.3. Observables de interés: e, m, C_V, χ	8
3. Métodos de Monte Carlo: Algoritmos de Metropolis	9
3.1. Aspectos generales	10
3.2. Algoritmos implementados	12
3.2.1. Algoritmo geométrico	13
3.2.2. Algoritmo PS	15
3.2.3. Algoritmo híbrido	18
4. Resultados numéricos	21
4.1. Caso $h = 0$	21
4.2. Caso $h \neq 0$	24
5. Conclusiones y perspectivas	29

1. Introducción

Hace ya algunos años, los trabajos de Prokof'ev y Svistunov en modelos cuánticos [1] y posteriormente en sistemas de espines clásicos (Ising, XY, Potts) en dos y tres dimensiones [2], introdujeron un nuevo método que permite abordar numéricamente el estudio de modelos físicos tanto en materia condensada como en altas energías, mediante diferentes generalizaciones que se han desarrollado en la última década [3–5].

Dicho método consiste en general en reemplazar la función de partición original, dada por una suma sobre configuraciones de los campos involucrados en el modelo particular, por una reformulación de esta, usualmente un desarrollo (ya sea de acoplo fuerte, altas temperaturas o en potencias del parámetro de *hopping* en *lattice* QCD). En un segundo paso, se extiende el nuevo espacio de configuraciones introduciendo *defectos* en la red, y haciendo que se propagen mediante un algoritmo de *gusano*, llamado así por la forma de las configuraciones que genera. Esto permite extraer información directa de las funciones de correlación a dos puntos. Más allá de que pueda mejorar la eficiencia en el cálculo de algunos observables, este enfoque permite superar, al menos en algunos casos, dos problemas fundamentales en el área de la simulación de sistemas físicos.

Por un lado ya en [2] y posteriormente en análisis más detallados de Deng y colaboradores en [6] y Wolff en [7], el algoritmo no presenta apenas *critical slowing down* (CSD), es decir, el exponente dinámico z con el cual escala el tiempo de autocorrelación integrado¹ es próximo a cero. Como consecuencia, se hace posible el cálculo de diferentes propiedades en los puntos críticos de los modelos, por ejemplo exponentes críticos, algo imposible para los algoritmos que presentan CSD.

No menos importante es el llamado problema del signo, que afecta a los casos en los que la acción del sistema es compleja, lo que ocurre por ejemplo en QCD a densidad finita ($\mu > 0$) o en sistemas con términos topológicos (θ term en QCD). Se trata de un problema computacional de la máxima dificultad, *NP-hard*, lo que implica que una solución general para este (en tiempo polinómico) probaría² $P = NP$, tal y como se explica en [9]. Aunque en principio es un asunto técnico, se trata en la práctica de un obstáculo insalvable en muchos casos. Si bien este algoritmo no soluciona el problema del signo de forma general, la reformulación de la función de partición llevada a cabo en trabajos posteriores, ha permitido evitarlo completamente en algunos modelos, recientemente en [4, 5] con Z_3 gauge-Higgs, [10] con $U(1)$ gauge-Higgs y [11] con el modelo de Ising con campo magnético imaginario.

El objetivo de este trabajo es el desarrollo de un algoritmo de simulación *geométrico* (en el sentido que se verá más adelante), en principio en un sistema suficientemente sencillo, que pueda servir para testear el algoritmo, y que a su vez tenga interés en altas energías. El modelo Z_2 gauge-Higgs es el elegido por cumplir lo anterior, ya que en $d = 2$ es dual al modelo de

¹ τ_{int} da una medida de la autocorrelación de la serie de datos obtenida en una simulación de Monte Carlo. Si el tamaño total de la muestra es N , únicamente $N_{eff} = N/2\tau_{int}$ datos son independientes, de cara a calcular los errores de los estimadores. Como $\tau_{int} \propto L^z$, los valores habituales de z en los algoritmos locales ($z \simeq 2$) hacen inviable simular tamaños del retículo grandes. Para un análisis más profundo de τ_{int} consultar la sección 3.1 ó [8].

² $P = NP$ es uno de los problemas del milenio propuestos por el *Clay Mathematics Institute*, premiado con un millón de dólares.

Ising con campo magnético en una red cuadrada. Dado que el algoritmo del gusano original [2] se realiza en su forma más sencilla precisamente en este último modelo, pero sin campo magnético, parece un buen campo de pruebas para intentar generalizar el algoritmo. Además, gracias a esta dualidad, podemos abordar también el modelo de Ising antiferromagnético, un sistema que pese a haber sido estudiado con anterioridad [12–14], incluso localizando mediante métodos de Monte Carlo [15,16] una línea de transición³, no ha sido estudiado con detalle en las regiones críticas mediante métodos numéricos.

En resumen, buscamos desarrollar nuevos algoritmos en un modelo *test*, Z_2 gauge-Higgs, que nos permitan superar las dificultades habituales al aplicar métodos de Monte Carlo a modelos tanto de altas energías como de materia condensada. Por otro lado, dada la dualidad de este modelo con el modelo de Ising con campo magnético, aprovecharemos para estudiar el sector antiferromagnético de este último.

2. Fundamentos teóricos

En esta sección describiremos el modelo que usaremos a lo largo de todo el trabajo, así como la dualidad que presenta con el modelo de Ising con campo magnético en una red cuadrada. Presentamos también los observables de interés que analizaremos en las siguientes secciones mediante métodos de Monte Carlo.

2.1. El modelo Z_2 gauge-Higgs

Partiremos del modelo Z_2 gauge-Higgs (también Ising gauge-Higgs) introducido por Wegner en [17] y Balian y colaboradores en [18]. En este modelo tenemos una red cúbica, en principio de dimensión arbitraria d y tamaño L , con condiciones de contorno periódicas. El número de puntos N (*sites*), que indexaremos con $n = 1, \dots, N$, es $N = L^d$. Las variables fundamentales serán los *links* $\sigma_{n\mu} \in Z_2$ que los unen (μ indica la dirección espacio-temporal) que se acoplarán a los campos de materia $z_n \in Z_2$, que residen en los propios *sites*. Será de utilidad definir también las llamadas variables plaqueta

$$\sigma_{n\mu\nu} := \sigma_{n\mu}\sigma_{n+\mu,\nu}\sigma_{n+\nu,\mu}\sigma_{n,\nu}, \quad (1)$$

como el producto de cuatro links contiguos, formando un cuadrado. Con estos elementos se construye la siguiente acción:

$$S = -\beta_G \sum_{\substack{n,\mu,\nu \\ \mu < \nu}} \sigma_{n\mu\nu} - \beta_I \sum_{n,\mu} z_n \sigma_{n\mu} z_{n+\mu}. \quad (2)$$

³En esto difiere del modelo ferromagnético, que no tiene transición de fase para $h \neq 0$.

Podemos simplificar la expresión trabajando con variables invariantes gauge (o lo que es lo mismo, escogiendo la gauge unitaria). Formalmente esto se traduce en introducir un cambio de variable

$$w_{n\mu} := z_n \sigma_{n\mu} z_{n+\mu}. \quad (3)$$

Por construcción $w_{n\mu\nu} = \sigma_{n\mu\nu}$ (las plaquetas son invariantes gauge), y la acción queda igual que en (2), salvo por la ausencia de las variables z_n . De este modo, tomamos directamente las $\sigma_{n\mu}$ como variables invariantes gauge y tenemos que S se reduce a

$$S = -\beta_G \sum_{\substack{n,\mu,\nu \\ \mu < \nu}} \sigma_{n\mu\nu} - \beta_I \sum_{n,\mu} \sigma_{n\mu}. \quad (4)$$

Para escribir la función de partición \mathcal{Z} asociada a esta acción, nos ayudamos del hecho de que las variables *link* (y también las variables plaqueta, por ser producto de las anteriores) están en Z_2 (es decir, son iguales a ± 1), verificándose entonces la siguiente identidad elemental,

$$e^{\beta\sigma} = \cosh \beta + \sinh \beta\sigma = \cosh \beta(1 + \tanh \beta\sigma), \quad (5)$$

que nos permite escribir $\mathcal{Z} = \sum_{conf} \exp(-S)$ de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= (\cosh \beta_G)^{d(d-1)N/2} (\cosh \beta_I)^{dN} \times \\ &\sum_{\{\sigma_{n\mu}\}} \prod_{\substack{n,\mu,\nu \\ \mu < \nu}} (1 + \tanh \beta_G \sigma_{n\mu\nu}) \prod_{n,\mu} (1 + \tanh \beta_I \sigma_{n\mu}). \end{aligned} \quad (6)$$

Para simplificar el trabajo conviene realizar un cambio de variable

$$\begin{aligned} x &= \tanh \beta_G, \\ y &= \tanh \beta_I, \end{aligned} \quad (7)$$

y prescindir del factor constante que precede a la suma sobre configuraciones. De este modo, la función de partición con la que trataremos viene dada por

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma_{n\mu}\}} \prod_{\substack{n,\mu,\nu \\ \mu < \nu}} (1 + x\sigma_{n\mu\nu}) \prod_{n,\mu} (1 + y\sigma_{n\mu}). \quad (8)$$

El siguiente paso es clave: la función de partición es una suma sobre todas las configuraciones posibles de links $\{\sigma_{n\mu}\}$. Antes de sumar, tenemos un polinomio en x e y de la forma

$$(1 + x\sigma_{P_1}) \cdots (1 + x\sigma_{P_{N_P}}) (1 + y\sigma_{l_1}) \cdots (1 + y\sigma_{l_{N_l}}), \quad (9)$$

donde N_l (N_P) es el número total de links (plaquetas). En este punto se produce cierto abuso de notación, ya que tanto para links como para plaquetas

se emplea la letra σ , de ahí el subíndice l o P para diferenciar ambos casos. Recordar además cómo una plaqueta es el producto de cuatro links contiguos. Expandiendo el producto, tendríamos un total de $2^{N_l+N_P}$ sumandos. Podemos escribir algunos de ellos para ejemplificar:

1. $y^2 \sigma_{l_1} \sigma_{l_2}$ (Escogiendo los dos primeros links, y el resto 1's)
2. $xy \sigma_{P_i} \sigma_{l_j}$ (Escogiendo la plaqueta i y el link j)
3. xy^4 (Escogiendo una plaqueta y los cuatro links asociados)

Sin embargo, al realizar la suma sobre configuraciones, dado que $\sigma \in Z_2$, los sumandos que contengan cualquiera de las variables link un número impar de veces se verán anulados, ya que

$$\sum_{\sigma_i=\pm 1} \sigma_i(\dots) = 0. \quad (10)$$

De los tres ejemplos anteriores, únicamente el tercero (término proporcional a la identidad del grupo, que en este caso es Z_2), contribuye a la función de partición. En general, un sumando cualquiera no se anulará si no contiene ninguna variable link suelta, o dicho de otro modo, si todas las variables link de dicho sumando aparecen un número par de veces. En caso contrario, la restricción (10) evita que el término contribuya. Notar que cada link puede aparecer una vez por el término que va con y , y hasta $2(d-1)$ veces más, una por cada plaqueta que lo contiene.

De lo anterior se deduce que cada sumando en (9) viene caracterizado por una lista de plaquetas y links, que denominaremos **activos**. De estos sumandos, únicamente contribuyen a la función de partición (8) aquellos en los que cada link aparece un número par de veces, y todos estos sumandos son simplemente multiplicados por un factor 2^N al hacer la suma sobre configuraciones, ya que son proporcionales a la identidad.

Lo anterior nos permite reinterpretar cada sumando como una nueva configuración g de la función de partición (8). Cada una de estas configuraciones viene caracterizada en principio por una lista de plaquetas activas y links activos. Si ahora definimos la frontera de las plaquetas activas como el conjunto de links compartidos por un número impar de plaquetas, la restricción de que cada link debe aparecer un número par de veces se traduce en que **una configuración válida viene dada por un conjunto de plaquetas activas, en cuya frontera residen links activos**. Por tanto cada configuración g viene caracterizada únivocamente por una lista de plaquetas activas, que denotaremos por $\{\sigma_{n\mu\nu}\}$, y su peso depende del número de estas y del número de links que contiene su frontera.

Es posible dar una interpretación más gráfica a lo anterior, visualizando cada configuración como (hiper)superficies, cerradas o abiertas, formadas por plaquetas activas. En las fronteras de las superficies abiertas es donde

encontraríamos los links activos. En el sentido anterior introducimos dos magnitudes, área y perímetro, como

$$\begin{aligned} A &\equiv \text{Número de plaquetas activas,} \\ P &\equiv \text{Número de links activos.} \end{aligned}$$

Con todo lo expuesto anteriormente, podemos reformular la función de partición original como una suma de *grafos* g admitidos, cada uno con un peso $w(g) = x^{A(g)}y^{P(g)}$, es decir

$$\mathcal{Z} = \sum_{g \in \mathcal{G}} w(g) = \sum_{g \in \mathcal{G}} x^{A(g)}y^{P(g)} \quad (11)$$

Siendo \mathcal{G} el conjunto de grafos permitidos, y donde hemos prescindido del factor común constante 2^N . Destacar que existen ejemplos recientes en la literatura en los que se emplea este tipo de reformulación de la función de partición, ver por ejemplo [3] para el modelo $U(1)$ gauge o [4] para Z_3 gauge-Higgs, así como [11] para el modelo de Ising con campo imaginario.

Podemos preguntarnos ahora cuántos grafos permitidos contribuyen a la función de partición (11). Dado que una configuración g viene caracterizada por una conjunto de plaquetas activas, habrá tantas como en $\{\sigma_{n\mu\nu}\}$, donde cada $\sigma_{n\mu\nu}$ puede estar activa o no. Por tanto, tendremos 2^{N_P} grafos g posibles. Es decir, hemos pasado de $2^{N_l} = 2^{dN}$ términos en la función de partición original a $2^{N_P} = 2^{d(d-1)N/2}$ contribuciones en la función reformulada. En cualquier caso, incluso para tamaños de la red modestos, contamos con un número de grafos demasiado grande como para sumar todas sus contribuciones de forma numérica; a modo de ejemplo, un retículo bidimensional 10×10 tendría 2^{100} sumandos. Por este motivo, recurriremos al empleo de métodos de Monte Carlo, explicados en la sección 3.

2.2. Caso $d = 2$: Dualidad con el modelo de Ising

El modelo Z_2 gauge-Higgs es dual al modelo de Ising con campo magnético para $d = 2$ [18]. Es relativamente sencillo ver esto partiendo de los resultados anteriores. Hemos visto cómo las configuraciones de grafos en (11) se correspondían una a una con las configuraciones de plaquetas $\{\sigma_{n\mu\nu}\}$. Definimos entonces los espines s_i en el retículo dual (que es el retículo cuyos *sites* están situados en el centro de las plaquetas del retículo original). Así pues, para cada $i \in [1, N]$ establecemos la siguiente correspondencia,

$$\begin{aligned} \sigma_{i12} = \text{activa} &\leftrightarrow s_i = -1, \\ \sigma_{i12} = \text{inactiva} &\leftrightarrow s_i = +1. \end{aligned} \quad (12)$$

Ahora podemos encontrar significado a las variables A y P empleadas en 11, y expresarlas en términos de estos espines duales. El área A es el número de

plaquetas activas, es inmediato entonces que podemos expresar A como

$$A = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (1 - s_i). \quad (13)$$

Por otra parte, la frontera de cada configuración viene definida en $d = 2$ por el conjunto de P links que pertenecen a una y sólo una de las A plaquetas activas. Para que un link que una los puntos i y j sólo pertenezca a una plaqueta, debe cumplirse que $s_i s_j = -1$, por tanto P puede escribirse

$$P = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (1 - s_i s_j), \quad (14)$$

donde $\langle ij \rangle$ denota a las parejas de puntos de la red vecinos. Si ahora introducimos ambas expresiones en la función de partición (11) llegamos a

$$\mathcal{Z} = 2^{2N} x^{\frac{N}{2}} y^N \sum_{\{s_i\}} x^{-\frac{1}{2} \sum_i s_i} y^{-\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j}. \quad (15)$$

Considerando $x, y \geq 0$ (es decir, $\beta_G, \beta_I \geq 0$), tenemos que la función de partición viene dada por

$$\mathcal{Z} = 2^{2N} x^{\frac{N}{2}} y^N \sum_{\{s_i\}} \exp \left(-\frac{1}{2} \log x \sum_i s_i - \frac{1}{2} \log y \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \right). \quad (16)$$

Salvo un factor constante, está es la función de partición del modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada,

$$\mathcal{Z}_{Ising} = \sum_{\{s_i\}} \exp \left(F \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i \right). \quad (17)$$

El acoplo F y campo magnético h se relacionan con nuestras variables según las siguientes expresiones

$$F = -\frac{1}{2} \log y, \quad h = -\frac{1}{2} \log x. \quad (18)$$

De cara a estudiar el diagrama de fases de este modelo, dado que \mathcal{Z}_{Ising} es invariante bajo el cambio $h \leftrightarrow -h$, la función de partición será simétrica bajo $x \leftrightarrow 1/x$, y por tanto bastará estudiar la región $0 < x \leq 1$. Además para $\beta_I \in [0, \infty)$ tenemos $y \in [0, 1) \rightarrow F > 0$, es decir: El modelo Z_2 gauge-Higgs es dual al modelo de Ising ferromagnético para $d = 2$. No obstante, una vez desarrollados los algoritmos para estudiar el primero, nada nos impide emplear $y > 1$ ($F < 0$) para analizar el modelo antiferromagnético, que tiene su propio interés como ya se ha comentado anteriormente.

2.3. Observables de interés: e, m, C_V, χ

Dada la dualidad anterior entre el modelo Z_2 gauge-Higgs y el modelo de Ising, parece lógico analizar los observables conocidos en este último. Estos se corresponden con las primeras derivadas de la función de partición, energía y magnetización (intensivas):

$$\langle m \rangle \equiv \frac{1}{N} \frac{d \log \mathcal{Z}}{dh} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i \right\rangle, \quad (19)$$

$$\langle e \rangle \equiv -\frac{1}{2N} \frac{d \log \mathcal{Z}}{dF} = \left\langle -\frac{1}{2N} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \right\rangle. \quad (20)$$

Si volvemos a mirar las expresiones de área y perímetro, veremos que están íntimamente relacionadas, de hecho

$$\begin{aligned} A &= \frac{N}{2}(1 - m), & P &= N(1 + e), \\ m &= 1 - \frac{2A}{N}, & e &= \frac{P}{N} - 1. \end{aligned} \quad (21)$$

De la definición vemos que $m \in [-1, 1]$ y $e \in [-1, 1]$, correspondiendo $e = -1$, $m = \pm 1$ al estado fundamental ferromagnético (todos los espines paralelos) y $e = +1$ al estado antiparalelo (tablero de ajedrez).

Para un sistema de tamaño infinito, m sería un buen observable, ya que sería nulo en la fase de alta temperatura y distinto de cero en la fase rota. Sin embargo, si el sistema es de tamaño finito, la simetría global Z_2 no se rompe espontáneamente. En la práctica, al simular tamaños finitos en la fase rota se observa cómo el sistema lleva a cabo un flip colectivo de los espines cada cierto tiempo, el valor esperado de la magnetización m tiende a cero. Para salvar este obstáculo y reflejar el comportamiento del sistema a tamaño infinito, emplearemos como observable alternativo el valor absoluto de la magnetización, $\langle |m| \rangle$, sabiendo que

$$\langle |m| \rangle \xrightarrow{L \rightarrow \infty} |\langle m \rangle|. \quad (22)$$

Introducimos también otra pareja de observables útiles a la hora de visualizar las transiciones de fase de segundo orden que se dan tanto en el modelo ferromagnético, en su punto crítico, como en el antiferromagnético, donde la transición permanece para $h \neq 0$. Estos son el calor específico C_V y la susceptibilidad magnética χ , las segundas derivadas de la función de partición (17):

$$\chi \equiv \frac{dm}{dh} = N \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right), \quad (23)$$

$$C_V \equiv -\frac{de}{dF} = 2N \left(\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2 \right). \quad (24)$$

En el caso de la susceptibilidad magnética χ , emplearemos en la práctica una versión alternativa en la que sustituiremos $\langle m \rangle$ por $\langle |m| \rangle$, por los mismos motivos que los expuestos más arriba para la magnetización, sabiendo que por 22, esta susceptibilidad también converge a la expresión convencional en el límite termodinámico.

Para la fase de alta temperatura, en la que para $L \rightarrow \infty$, $\langle |m| \rangle = 0$, se define la susceptibilidad de la siguiente forma, que se empleará en 3.2.2:

$$\chi' = N \langle m^2 \rangle. \quad (25)$$

Como también estudiaremos el sector antiferromagnético ($F < 0$), conviene introducir las magnitudes análogas a $\langle |m| \rangle$ y χ en esta región. Con esto en mente, sean i y j la fila y la columna de un sitio de la red determinado. Diremos que dicho sitio es par si $i+j$ lo es (y de igual modo en el caso impar). Así, podemos dividir el retículo en dos subredes, la formada por los espines pares y la formada por los impares. La suma de la magnetización de ambas subredes nos da la magnetización total m ; su resta nos da el observable que buscamos, la magnetización *staggered*, m_{stag} , que es máxima para el estado antiferromagnético. A partir de esta, se introduce la susceptibilidad *staggered* como

$$\chi_{stag} = N \left(\langle m_{stag}^2 \rangle - \langle m_{stag} \rangle^2 \right), \quad (26)$$

si bien en la práctica emplearemos $\langle |m_{stag}| \rangle$ en vez de $\langle m_{stag} \rangle$, por los mismos motivos que con la magnetización normal.

3. Métodos de Monte Carlo: Algoritmos de Metropolis

Para poder abordar el cálculo de los observables de interés del modelo, se hace necesario el uso de métodos de Monte Carlo. Así pues, se genera un conjunto suficientemente grande de configuraciones g_α con probabilidad $e^{-S(\alpha)}$, en nuestro caso $p(\alpha) = x^{A(\alpha)} y^{P(\alpha)}$. Una vez se dispone de estas configuraciones, es inmediato calcular los observables \mathcal{O}_α , y pueden estimarse los valores esperados de estos simplemente como

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \mathcal{O}_\alpha. \quad (27)$$

Este proceso por el cuál se escogen preferentemente las configuraciones que más contribuyen a la función de partición se conoce como *importance sampling*. Existen diferentes posibilidades a la hora de implementar un algoritmo que genere el conjunto de configuraciones que necesitamos. Uno de los

más sencillos, y también más usados, es el de Metropolis [19]. De forma esquemática, funciona de la siguiente manera:

1. Se escoge una configuración de partida g_0 válida.
2. Se propone un cambio *pequeño* del estado del sistema actual, llamémosle i , a un nuevo estado j .
3. Con probabilidad $\min\{1, \exp(-[S(j) - S(i)])\}$, se escoge la configuración j para g_1 . En caso contrario, se mantiene la configuración i (es decir, se vuelve a contar).
4. Se repiten los pasos 2-3 hasta conseguir una muestra g_α lo suficientemente grande (muchas veces esto sólo se sabe *a posteriori* o por experiencia previa).

El método descrito anteriormente sigue siendo bastante general, ya que falta definir el aspecto clave del punto dos: qué mecanismo usamos para movernos por el espacio de configuraciones y pasar de i a j . Es justo cómo definamos este movimiento (paso de Metropolis) lo que caracterizará el algoritmo. Por otro lado, ciertos aspectos como el cálculo de los observables después de cada paso de Metropolis, y cómo se abordan la termalización, autocorrelación y tratamiento de los errores, son independientes de los algoritmos empleados para generar los datos, y serán discutidos a continuación.

3.1. Aspectos generales

Dada la naturaleza estocástica de los métodos de Monte Carlo, en todos ellos se hace necesario dar un tratamiento estadístico adecuado a los resultados obtenidos, que se traducirá en calcular los errores asociados a los estimadores \bar{O} de cada observable medido. En general, siempre tendremos una serie de datos O_i que podemos identificar como una *cadena de Markov* (generada por el algoritmo correspondiente) que presenta habitualmente dos problemas:

- *Termalización.* Al empezar la simulación y escoger una primera configuración válida, es habitual que esta se encuentre muy *lejos* de ser representativa y, dado que la muestra final es finita, las primeras medidas introducen un error sistemático (*bias*) en el estimador del observable, por aparecer con un peso mayor al que les correspondería.
- *Autocorrelación.* Una vez la cadena de Markov ha alcanzado el equilibrio, los elementos que la componen poseen cierta correlación, que provoca que los *errores estadísticos* sean mayores que en una muestra de datos independientes.

Resolver el primer problema en nuestro caso particular se reduce a descartar los primeros resultados generados en cada simulación. Siguiendo la evolución (en el tiempo de Monte Carlo) de los diferentes observables, se comprueba

visualmente cuánto tarda el sistema en alcanzar el equilibrio en el peor de los casos, que en este modelo es el punto crítico dual al de Ising para $h = 0$. Una vez comprobado esto para cada tamaño de retículo en el que se lleven a cabo simulaciones, se descartan un número suficiente de medidas iniciales. En la práctica, como los datos se guardan en diferentes archivos al ser generados, basta con prescindir de un pequeño número de estos en el programa de análisis.

Respecto al segundo punto, para discutir el problema que supone la autocorrelación de los datos, conviene introducir el tiempo de autocorrelación integrado τ_{int} [8, 21]. Para ello, consideremos la cadena de Markov compuesta por las n medidas \mathcal{O}_i de cierto observable \mathcal{O} . El estimador (sin sesgo) del valor esperado es

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathcal{O}_i. \quad (28)$$

Y la varianza de dicho estimador viene dada por

$$var(\bar{\mathcal{O}}) = \frac{1}{n} \sum_{t=-n}^n \left(1 - \frac{|t|}{n}\right) C(t) \quad (29)$$

$$\approx \frac{1}{n} (2\tau_{int}) C(0) \quad \text{con} \quad n \gg \tau. \quad (30)$$

Donde $C(t)$ es la función de autocorrelación sin normalizar, definida por

$$C(t) = \langle \mathcal{O}_i \mathcal{O}_{i+t} \rangle - \langle \mathcal{O}_i \rangle \langle \mathcal{O}_i \rangle, \quad (31)$$

de forma que $C(0)/n$ coincide con la varianza *naïf*, la que corresponde al caso de medidas totalmente descorrelacionadas. A la vista de (30), resulta ahora más claro el porqué del problema que supone el CSD. El error crece con la raíz cuadrada de la varianza, y por tanto es proporcional a $\sqrt{\tau_{int}}$.

Visto lo anterior, si queremos obtener las varianzas de cada observable se hace necesario determinar el tiempo de autocorrelación integrado en cada caso. Además también es conveniente añadir una estimación del error asociado al estimador de τ_{int} , para tener una idea de si el análisis de los errores es adecuado. Para ello, seguimos el mismo razonamiento que en [21] (p179-182), introduciendo el siguiente estimador para τ_{int}

$$\hat{\tau}_{int}(M) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^M \rho(t), \quad (32)$$

siendo $\rho(t) = C(t)/C(0)$, la función de autocorrelación normalizada. El parámetro M que acota la suma de funciones $\rho(t)$ se introduce para evitar una patología del estimador: la varianza de $\hat{\tau}_{int}(M \rightarrow \infty)$ no tiende a

cero cuando el tamaño de la muestra n tiende a infinito. El estimador truncado evita este problema, pero es sesgado. Su error sistemático (*bias*) viene dado por la siguiente expresión

$$bias(\hat{\tau}_{int}) = - \sum_{t>M} \rho(t) + o\left(\frac{1}{n}\right). \quad (33)$$

Además presenta un error estadístico, siendo su varianza

$$var(\hat{\tau}_{int}) \approx \frac{2(2M+1)}{n} \tau_{int}^2 \quad \text{con} \quad \tau_{int} \ll M \ll n. \quad (34)$$

Por tanto se hace necesario llegar a un compromiso entre ambos errores. Esto se traduce en escoger un valor de M lo suficientemente grande como para que las contribuciones de $\rho(t)$ despreciadas sean muy pequeñas, reduciendo así el *bias*, pero no tan grande como para que la varianza se dispare. En la práctica nos encontramos curvas como la de la figura 1 que, tras un tramo inicial de crecimiento, se estabilizan en una planicie (valores óptimos para M) antes de mostrar un comportamiento más *ruidoso*. Aunque existen algoritmos que seleccionan automáticamente el valor de M , resulta aconsejable verificar el comportamiento de estas curvas $\hat{\tau}_{int}(M)$ mediante inspección visual, al menos para un número de casos significativo.

Cabe destacar que, especialmente en las fases iniciales del trabajo, se han utilizado herramientas alternativas de análisis de errores. Los conocidos como métodos de *binning* (también *Jackknife binning*) [22, 23], enfocan el problema de la autocorrelación de la cadena markoviana de forma diferente. En líneas generales, se trata de agrupar los datos en contenedores (*bins*) de cierto tamaño, obteniendo una nueva muestra cuyos datos deberían ser aproximadamente independientes, al menos para un tamaño de bloque suficientemente grande. Representando los errores frente al tamaño del bloque se obtienen curvas similares a las del método de las funciones de autocorrelación, si bien con un comportamiento más ruidoso. No obstante, en todas las pruebas realizadas los errores obtenidos han sido compatibles entre sí, dadas sus incertidumbres.

3.2. Algoritmos implementados

A continuación se describirán en detalle los tres algoritmos implementados en este trabajo, para los que se han obtenido los resultados numéricos presentados en la sección 4. Cabe destacar que a diferencia de los algoritmos de cluster [20], todos ellos son *locales*, en el sentido de que en cada paso de Metropolis elemental se modifica una parte del sistema, sin necesidad de conocer el estado de ningún elemento fuera del entorno de este.

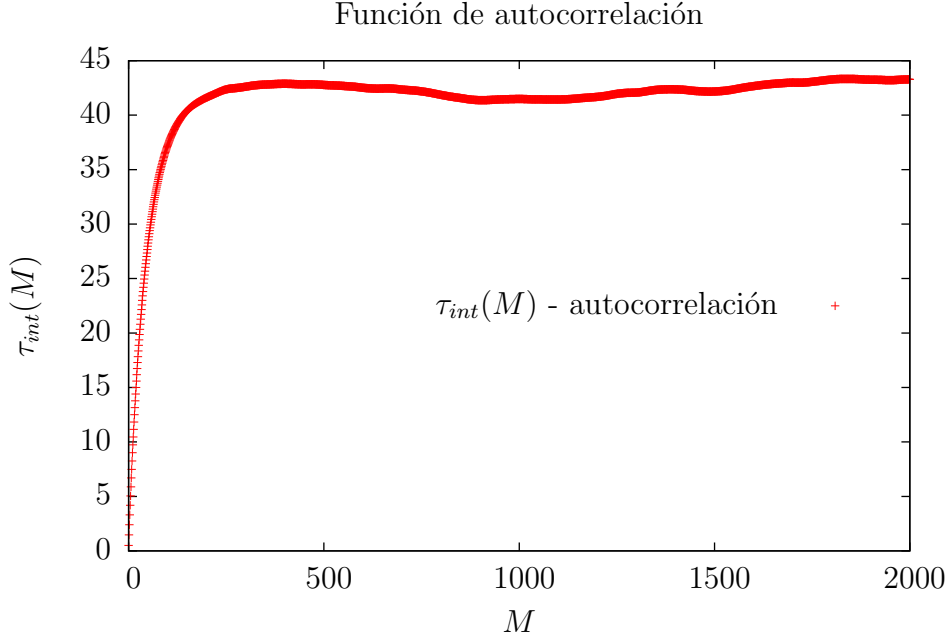


Figura 1: Ejemplo de una curva $\tau_{int}(M)$ para $L = 32$, en el punto crítico ferromagnético, $(x, y) = (1, \sqrt{2} - 1)$, correspondiente al observable e en el algoritmo geométrico. Tras el crecimiento inicial, puede apreciarse una zona plana que acaba con un comportamiento ruidoso.

3.2.1. Algoritmo geométrico

La idea del algoritmo geométrico es simple: simular el modelo mediante una rutina de Monte Carlo que recorra el espacio de configuraciones \mathcal{G} , tal y como se define en la sección 2.1. Le llamaremos geométrico por que su principal característica es que trabaja con un espacio de configuraciones compuesto por *grafos*, (híper)superficies abiertas o cerradas formadas por plaquetas activas. Recordar que existen un total de 2^N grafos $g \in \mathcal{G}$ admitidos, siendo N el número de *sites* de la red, ya que cada uno viene caracterizado unívocamente por una configuración de plaquetas activas/inactivas $\{\sigma_{n\mu\nu}\}$.

Tal y como se ha descrito al comienzo de la sección, la probabilidad de aceptar el cambio propuesto en un paso de Metropolis dado es $\min\{1, \alpha\}$, con α el cociente entre las probabilidades de la configuración propuesta, llamémosla g_{new} y la de partida, g . Teniendo en cuenta (11), α viene dada

	Activar una plaqueta				
# vecinos	0	1	2	3	4
ΔA	1				
ΔP	4	2	0	-2	-4
α	xy^4	xy^2	x	x/y^2	x/y^4

Tabla 1: Probabilidades del paso de Metropolis elemental al activar una plaqueta con un número de vecinos activos dado.

	Desactivar una plaqueta				
# vecinos	0	1	2	3	4
ΔA	-1				
ΔP	-4	-2	0	2	4
α	$1/xy^4$	$1/xy^2$	$1/x$	y^2/x	y^4/x

Tabla 2: Probabilidades del paso de Metropolis elemental al desactivar una plaqueta con un número de vecinos activos dado.

por

$$\alpha = \frac{p(g_{new})}{p(g)} = x^{\Delta A} y^{\Delta P}, \quad (35)$$

definiendo $\Delta A \equiv A(g_{new}) - A(g)$, $\Delta P \equiv P(g_{new}) - P(g)$. Sabiendo esto, introducimos el paso elemental de Metropolis como el intento de activar/desactivar una plaqueta (o en términos de la dualidad, flipar un espín). Al hacerlo, siempre incrementaremos o disminuirémos el área en una unidad. El incremento en el perímetro depende del número de plaquetas vecinas activas en el momento de realizar el cambio. Para el caso $d = 2$, en el que el número de vecinos activos está entre 0 y 4, escribimos explícitamente en las tablas 1 y 2 las probabilidades α correspondientes a activar o desactivar una plaqueta.

El paso elemental que hemos definido intenta cambiar el estado de una única plaqueta. Para conseguir un paso de Metropolis ergódico⁴, es decir, para poder alcanzar cualquier configuración partiendo de una dada, podemos

⁴En el caso $x = y = 1$ el sistema hace un flip colectivo. Para subsanar este caso, por otro lado trivial, puede cambiarse el paso secuencial por una elección de las plaquetas aleatoria. No obstante en el caso general es preferible la elección secuencial por ser más eficiente.

realizar sucesivamente N pasos elementales, secuencialmente. Esto es, en cada pasada o *sweep* intentamos activar/desactivar cada una de las plaquetas del sistema, una a una y por orden, pudiendo llegar así a cualquier punto del espacio de configuraciones con probabilidad no nula.

3.2.2. Algoritmo PS

El siguiente algoritmo que describiremos es una implementación propia del algoritmo original de Prokof'ev y Svistunov [2], en adelante algoritmo PS. El objetivo es tener una referencia con la que poder comparar y en la que de antemano sabemos que no se da *critical slowing down* [7]. Además, entender qué posee de diferente frente a los algoritmos locales habituales, puede ayudarnos a la hora de desarrollar generalizaciones que conserven algunos de sus beneficios.

La idea fundamental de este algoritmo es cambiar el espacio de configuraciones original, en nuestro caso el conjunto de grafos \mathcal{G} , por un espacio extendido \mathcal{G}_{ext} , de forma que $\mathcal{G} \subset \mathcal{G}_{ext}$. En la práctica, esto permite al algoritmo pasar de unas configuraciones a otras dentro de \mathcal{G} (también llamadas *configuraciones de vacío* en la literatura) a través de nuevos caminos que se abren gracias a las configuraciones añadidas en \mathcal{G}_{ext} . Estas últimas configuraciones se construyen mediante la inclusión de *defectos* en la red, entendidos como violaciones de las restricciones que se aplican para determinar qué grafos son válidos y cuáles no. Por ejemplo, en el modelo Z_2 gauge-Higgs, las configuraciones de vacío, que hemos llamado anteriormente *grafos válidos*, son superficies formadas por variables plaqueta (*activas*) y variables link en su frontera, definiendo frontera como los links que pertenecen a un número impar de plaquetas (con $d = 2$ esto se reduce a los links que pertenecen a una única plaqueta). Introducir defectos significaría por ejemplo definir \mathcal{G}_{ext} como todas las configuraciones que cumplen la restricción anterior, salvo en dos links l_1 y l_2 . Si $l_1 = l_2$, el defecto se corrige, y recuperamos las configuraciones de vacío.

En el modelo de Ising bidimensional sin campo magnético, el caso más sencillo expuesto en [2], el espacio de configuraciones base es en principio $\{s_i\}$, siendo la función de partición

$$\mathcal{Z}_{Ising} = \sum_{\{s_i\}} \exp \left(F \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \right). \quad (36)$$

Repitiendo el razonamiento de la dualidad expuesta en 2.2 en sentido opuesto, se encuentra que el modelo puede ser expresado en términos de variables *link* $\sigma_{n\mu}$. Para ello se emplea la identidad (5) de forma que

$$\mathcal{Z}_{Ising} = 2^N (\cosh F)^{N_l} \sum_{\{s_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + s_i s_j \tanh F), \quad (37)$$

con N y N_l el número de sitios y links de la red, respectivamente. Al realizar la suma sobre todas las configuraciones, únicamente sobreviven aquellas en las que los espines de cada sitio de la red aparecen un número par de veces. Haciendo $\sigma_{n\mu} = -s_n s_{n+\mu}$, la condición se traduce en que las configuraciones válidas son caminos de links cerrados, llegando finalmente a

$$\mathcal{Z}_{Ising} \propto (\cosh F)^{N_l} \sum_{g \in \mathcal{G}} w(g) \quad \text{con} \quad w(g) = (\tanh F)^P, \quad (38)$$

con $P = \sum_{n\mu} (1 + \sigma_{n\mu})/2$ el perímetro, o número de links *activos* (iguales a 1, tal y cómo los hemos definido).

Ahora podríamos realizar una rutina de Monte Carlo para muestrear el sistema, o también hacer equivaler cada configuración de caminos cerrados con una configuración de plaquetas activas, pero nos quedamos con la formulación en términos de links por resultar más adecuada para extender el espacio de configuraciones. Para ello, consideramos la función de correlación de dos espines en el modelo de Ising, $G(i_1 - i_2) = \langle s_{i_1} s_{i_2} \rangle$, por definición igual a $g(i_1 - i_2)/Z$ con

$$g(i_1 - i_2) = \sum_{\{s_i\}} s_{i_1} s_{i_2} \exp \left(F \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \right). \quad (39)$$

Podemos proceder igual que con (36), llegando a

$$g(i_1 - i_2) = \sum_{\{s_i\}} s_{i_1} s_{i_2} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + s_i s_j \tanh F). \quad (40)$$

Si nos preguntamos ahora qué tipos de configuraciones $g \in \mathcal{G}_{ext}$ contribuyen a la función $g(i_1 - i_2)$ tras la suma sobre $\{s_i\}$, la respuesta es *casi idéntica* a la del caso anterior: todas en las que en cada sitio de la red confluyan un número par de links (\mathcal{G}), **más** aquellas en las que incidan un número par de links sobre todos los sitios de la red salvo i_1 e i_2 . Por tanto en \mathcal{G}_{ext} , además de las configuraciones de caminos de links cerrados, se permite un único camino adicional, cuyos extremos sean i_1 e i_2 .

Cabe destacar que $g(0)$ y Z poseen idénticas configuraciones. Esto hace posible que llevando a cabo un proceso de Monte Carlo para $g(i_1 - i_2)$, se acumule la estadística necesaria para calcular $G(i_1 - i_2) = g/Z$. Los estimadores empleados en el conjunto \mathcal{G}_{ext} serán

$$g(i) = \delta_{i, i_1 - i_2}, \quad Z = \delta_{i_1, i_2}, \quad (41)$$

siendo G el ratio entre ambos. Una vez estimada la función de correlación a dos puntos, podemos obtener dos observables de los que ya se ha hablado

con anterioridad, energía y susceptibilidad magnética, esta última definida como en (25):

$$e = -\frac{1}{4} \sum_{|i|=1} \frac{g(i)}{Z}, \quad \chi' = \sum_i \frac{g(i)}{Z}. \quad (42)$$

La energía también puede obtenerse a través del perímetro en las configuraciones de vacío. Derivando la función de partición en (38), obtenemos un segundo estimador para la energía

$$-e \equiv \frac{1}{2N} \frac{d \log Z}{dF} = \tanh F + \frac{1 - (\tanh F)^2}{\tanh F} \frac{P}{2N}, \quad (43)$$

únicamente válido para $i_1 = i_2$. También es posible obtener el calor específico en las configuraciones de vacío a partir del valor esperado de P y P^2 . Derivando la expresión de la energía anterior respecto a F , obtenemos, tras un poco de álgebra:

$$C_V = (1 - a^2) + \frac{1}{2N} \left(a^2 - \frac{1}{a^2} \right) \langle P \rangle + \frac{1}{2N} \left(\frac{1 - a^2}{a} \right)^2 \left(\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 \right), \quad (44)$$

donde hemos introducido $a = \tanh F$ para simplificar la notación.

El algoritmo PS o algoritmo del gusano, es una forma de avanzar por el espacio de configuraciones \mathcal{G}_{ext} . Dicho de otro modo, define el paso de Metropolis a realizar para muestrear \mathcal{G}_{ext} . El paso más elemental del algoritmo se define de forma que si $i_1 \neq i_2$, intenta **desplazar** el defecto i_1 a un sitio de la red adyacente, elegido al azar, cambiando el estado del link que une el sitio original con el nuevo. De (38) se deduce que el cambio se aceptará con probabilidad

$$\min \{1, \tanh F\}, \quad (45)$$

si se intenta activar un link y

$$\min \{1, (\tanh F)^{-1}\}, \quad (46)$$

en el caso de que se intente desactivar un link. De aquí viene la denominación de *algoritmo del gusano*, ya que la evolución de Monte Carlo consiste en caminos abiertos que van abriéndose paso por el retículo. Además, si $i_1 = i_2$, se intenta **cambiar la posición** de ambos defectos con cierta probabilidad p (arbitraria a la hora de dar el resultado correcto) a otro sitio de la red elegido al azar. Dependiendo de cómo combinemos estos pasos elementales obtendremos diferentes versiones del algoritmo con diferente coste computacional. Hasta tres variantes diferentes han sido implementadas:

- *PS original*. El algoritmo tal cual es presentado en [2]: si $i_1 = i_2$ intenta cambiar la posición de los defectos con probabilidad p ($p = 0,5$, aunque tras varias pruebas se ha comprobado que esto tiene poca influencia en el algoritmo), y con probabilidad $1 - p$ hacer un desplazamiento de i_1 . Si $i_1 \neq i_2$, siempre se intenta desplazar i_1 .
- *Wolff*. El algoritmo descrito por Wolff en [7], que consta de dos pasos. En el primero, siempre intenta desplazar i_1 . El segundo únicamente se lleva a cabo si $i_1 = i_2$, intentando cambiar la posición de los defectos con probabilidad p (con probabilidad $1 - p$ no hace nada, a diferencia del PS original).
- *Bicéfalo*. Esta es una propuesta propia, realizada con el objetivo de lograr un mejor rendimiento del algoritmo (en términos de su coste computacional). A diferencia de los anteriores, únicamente se emplea el paso elemental del desplazamiento de un defecto. En cada paso de Metropolis, primero se intenta desplazar i_1 , y acto seguido i_2 . De esta forma, el camino abierto de la configuración o *gusano*, avanza por ambos extremos (de ahí la denominación de bicéfalo).

En las tres variantes el modo de tomar medidas es idéntico: se empieza la simulación con una configuración de vacío, y se deja avanzar hasta que se vuelve a encontrar otra, es decir, hasta que i_1 vuelve a ser igual a i_2 . En un *sweep* como este, únicamente la última configuración contribuye a la función de partición, y la estimación de los observables (42) se vuelve inmediata: χ es el número de pasos de Metropolis dados en el sweep y e el número de veces que la distancia entre i_1 e i_2 ha sido la unidad ($|i| = 1$) en el mismo.

Dado que de las tres variantes implementadas, la que menos coste computacional tiene es la que hemos denominado bicéfala (ver figura 2), es esta la que usaremos para llevar a cabo los cálculos de la sección 4, tanto para el cálculo de los observables con $h = 0$, como para su comparación con los otros algoritmos.

3.2.3. Algoritmo híbrido

Conociendo el funcionamiento de los dos algoritmos anteriores, cabe preguntarse si una mezcla de ambos podría abordar modelos más generales que el algoritmo PS, como nuestro Z_2 gauge-Higgs, y a la vez conservar las buenas propiedades de este. Un ejemplo de tal intento es el de Mercado y colaboradores en [5], donde abordan los modelos Z_3 y $U(1)$ gauge-Higgs con $d = 4$. Siguiendo su filosofía, vamos a implementar una versión del bautizado como *surface worm algorithm* (SWA), adaptado al modelo Z_2 gauge-Higgs en dos dimensiones. Nuestro objetivo será estudiar la presencia o no de *critical slowing down*, algo que queda sin determinar en la referencia mencionada.

Figura de mérito para las diferentes variantes

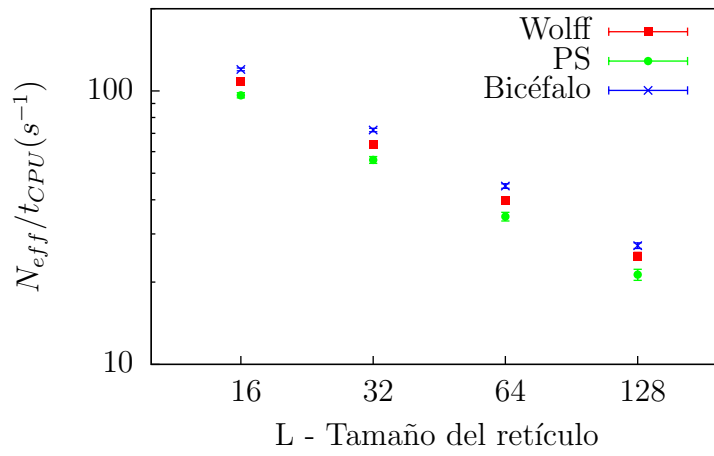


Figura 2: Comparación del coste computacional de las diferentes variantes de algoritmos PS en el punto crítico del modelo de Ising. La figura de mérito presentada es el número de medidas efectivas estadísticamente independientes obtenidas en cada segundo de cómputo, es decir $N_{eff}/t_{CPU} = N/(2*\tau_{int}*t_{CPU})$. Los tiempos de autocorrelación son los correspondientes al estimador (43). Si bien la dependencia con L es similiar para los 3 casos, la variante bicéfala es más eficaz en todos los tamaños ensayados.

	Activar una plaqueta			Desactivar una plaqueta		
# links activados	2	0	-2	2	0	-2
ΔA	1			-1		
ΔP	2	0	-2	2	0	-2
α	xy^2	x	x/y^2	y^2/x	$1/x$	$1/xy^2$

Tabla 3: Probabilidades del paso de Metropolis elemental al activar una plaqueta.

El espacio de configuraciones \mathcal{G} es en este caso el mismo que en el algoritmo geométrico (3.2.1). Además se añaden las configuraciones que cumplen las restricciones propias de \mathcal{G} en todos los links salvo en uno, L_V , para formar \mathcal{G}_{ext} . Los observables que se miden en este caso son también los mismos que para el algoritmo geométrico. Dicho de otro modo, sólo se mide en las configuraciones de vacío, empleando las configuraciones de \mathcal{G}_{ext} únicamente para conseguir una evolución de Monte Carlo diferente.

El paso de Metropolis de este algoritmo se estructura como sigue:

1. Partimos de una configuración válida (de vacío). Se elige un link al azar, L_V , y se intenta insertar un defecto (cambiar su estado de activo a inactivo, o viceversa), con probabilidad

$$\min\{1, \alpha\} \quad \text{con} \quad \alpha = \begin{cases} y, & \text{para activar un link ,} \\ 1/y, & \text{para desactivar un link .} \end{cases}$$

Si se inserta el defecto se sigue con el siguiente punto, en caso contrario el paso de Metropolis acaba aquí.

2. En esta situación se tiene una configuración con un defecto en L_V . Se escoge una dirección y sentido al azar. Si es paralela al defecto L_V , se intenta subsanar con las mismas probabilidades que en el punto uno. Si se tiene éxito, hemos llegado a una configuración de vacío y el gusano acaba, en caso contrario se repite el punto 2.

Si la dirección no es paralela a L_V , se intenta propagar el segmento mediante la adición de un *segmento*. Este segmento esta formado por una plaqueta, adyacente a L_V , y dos links escogidos al azar entre los tres restantes. El link que queda sin escoger sería (si se acepta el cambio) la nueva ubicación del defecto. Las probabilidades dependen del número de links y plaquetas a activar/desactivar, y vienen detalladas en la tabla 3. Tanto si se acepta el segmento como si no, se vuelve a repetir el punto 2.

Entre los cambios que puede llevar a cabo este paso, está el de activar / desactivar una plaqueta (introducir un defecto, añadir un segmento y sanar

el defecto), por lo que la ergodicidad del algoritmo está asegurada. Además, en cada sweep (después del cual se toman las medidas de los observables, definidos en 2.3) llevamos a cabo tantos de los pasos anteriores como *sites* haya en la red.

4. Resultados numéricos

En esta sección se muestran los resultados obtenidos por los algoritmos presentados con anterioridad. En primer lugar veremos los correspondientes al caso particular $x = 1$, es decir, al caso sin campo magnético. Comparando los valores de los estimadores de cada algoritmo, podremos verificar que los hemos implementado correctamente. Hecho esto compararemos el coste computacional de cada algoritmo en el punto crítico. Para acabar, mostraremos los resultados obtenidos para el espacio de parámetros completo, esto es: para $h \neq 0$, incluyendo el caso antiferromagnético $F < 0$.

4.1. Caso $h = 0$

En este caso podemos comparar los datos de los tres algoritmos entre sí, analizando la dependencia de diferentes observables con el acoplo F en un entorno del punto crítico ferromagnético

$$F_c = \frac{1}{2} \log(\sqrt{2} - 1) \approx 0,44068679350977 \dots \quad (47)$$

Los casos de la energía, el calor específico C_V y la susceptibilidad magnética χ' , se presentan en las figuras 3, 4 y 5, respectivamente. El valor absoluto de la magnetización se obtiene únicamente del algoritmo geométrico y del híbrido, y se presenta en la figura 6. Vemos en todas ellas cómo existe un buen acuerdo entre los diferentes algoritmos, dados los errores estadísticos asociados (las barras de error corresponden en todos los casos a 1σ , y se han calculado siguiendo los procedimientos indicados en 3.1). Además también se han comparado los valores de la energía y la susceptibilidad en el punto crítico con los obtenidos por Wolff en [7], obteniendo un acuerdo igual de satisfactorio.

Considerando estas pruebas como un buen test de que los algoritmos están correctamente implementados, podemos comparar la eficiencia de estos en el punto crítico. Para ello introducimos la siguiente figura de mérito:

$$Err_O^2 \times t_{CPU}. \quad (48)$$

Dado que los errores de cada observable decrecen con $1/\sqrt{N}$, la cantidad definida tiende a una constante que nos dice, para un tiempo de cómputo

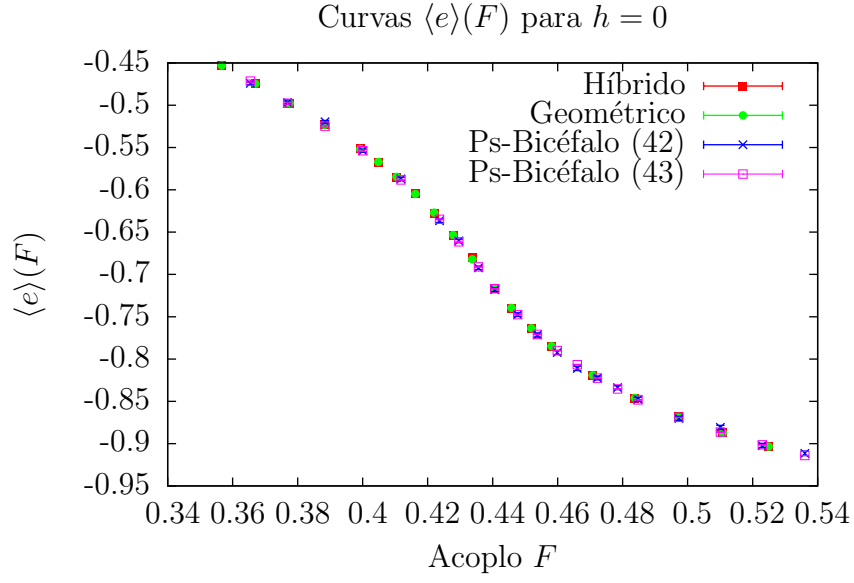


Figura 3: Energía e en función del acoplo F , retículo 32×32 .

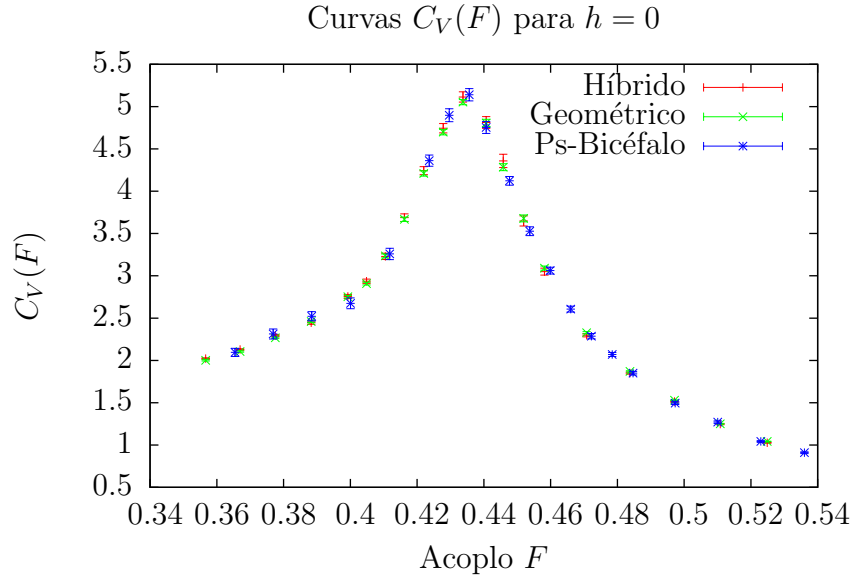


Figura 4: Capacidad calorífica C_V en función del acoplo F , retículo 32×32 .

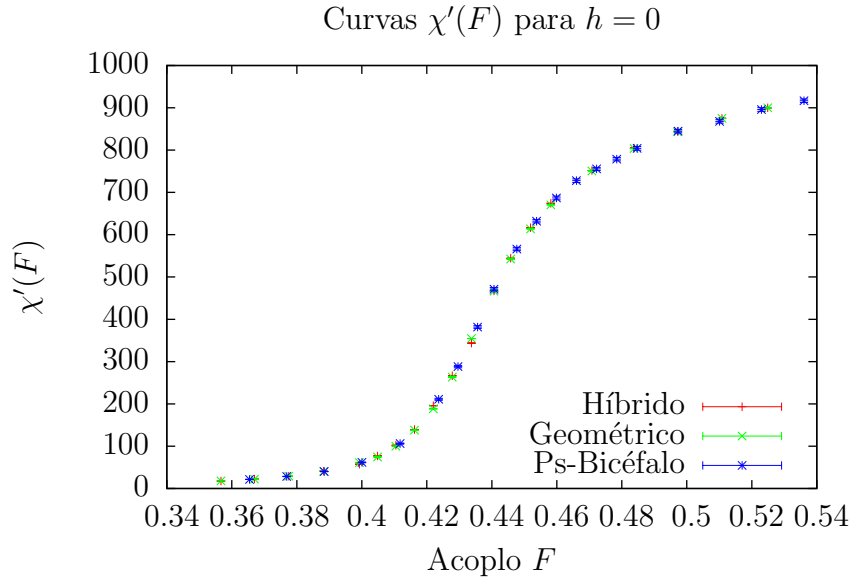


Figura 5: Susceptibilidad χ' en función del acoplo F , retículo 32×32 .

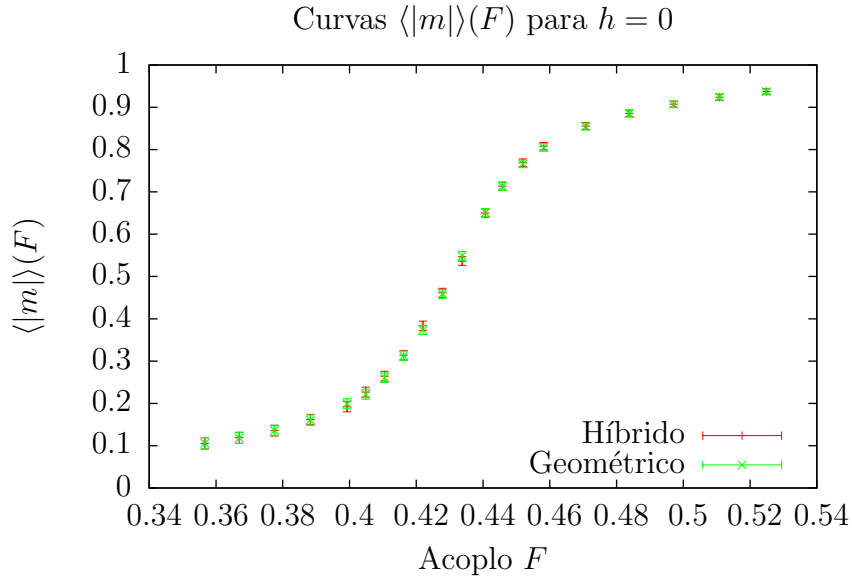


Figura 6: Magnetización $\langle |m| \rangle$ en función del acoplo F , retículo 32×32 .

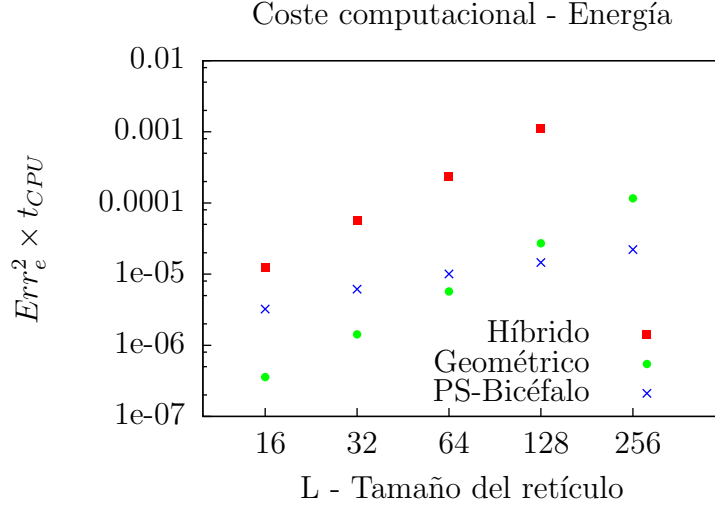


Figura 7: Coste computacional en el caso de la energía para los diferentes algoritmos en función del tamaño del retículo L .

t_{CPU} dado, que nivel de error relativo puede darnos el algoritmo en la determinación de un cierto observable \mathcal{O} . Por tanto cuánto más pequeño sea este valor, más eficaz será el algoritmo.

En las figuras 7 y 8 se presentan los resultados correspondientes a la energía e y al calor específico C_V , para diferentes tamaños de retículo. Vemos que el algoritmo híbrido resulta ser el menos eficiente en todos los casos, por lo que, aún habiendo visto que proporciona resultados correctos, lo descartamos para los cálculos posteriores. Además, el coste computacional del algoritmo geométrico y del híbrido crecen de forma similar (misma pendiente) frente al del algoritmo PS en su variante bicéfala, que demuestra ser más eficiente a la hora de simular retículos de mayor tamaño (en torno a $L > 64$ para e y $L > 128$ para C_V). Precisamente en este hecho se ve cómo el algoritmo PS apenas padece *critical slowing down*, si bien sus estimadores poseen varianzas considerables, que lo hacen menos recomendable para tratar con tamaños de retículo pequeños.

4.2. Caso $h \neq 0$

Empleando el algoritmo geométrico, y un tamaño de retículo de 16×16 , realizamos simulaciones para más de diez mil puntos del espacio de parámetros (F, h) , analizando los diferentes observables presentados en 2.3. Observando las figuras 9 y 10, vemos en primer lugar que los diagramas son simétricos bajo el cambio $h \leftrightarrow -h$, tal y como esperábamos. En el sector

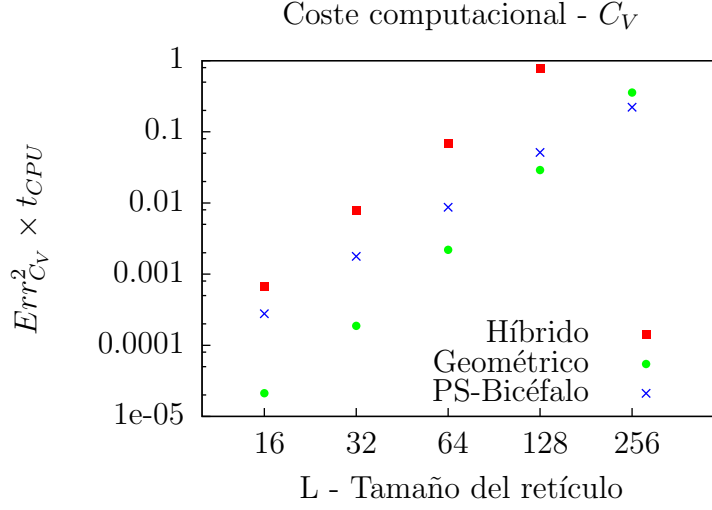


Figura 8: Coste computacional en el caso de C_V para los diferentes algoritmos en función del tamaño del retículo L .

ferromagnético ($F > 0$) se presentan dos fases posibles: una magnetizada para valores grandes del acoplo F o el campo h , y otra de alta temperatura para valores pequeños de estos parámetros. Además, de la forma de la susceptibilidad χ se deduce que la transición entre estas fases únicamente se produce de forma *brusca* para $h = 0$. Dicho de otro modo, se reproduce el resultado conocido de que en el límite termodinámico únicamente existe transición de fase para $h = 0$.

Por otro lado, en el sector antiferromagnético ($F < 0$) podemos distinguir hasta tres fases diferentes. Para valores grandes de h volvemos a tener la fase magnetizada, y también una fase de alta temperatura en la que $\langle |m| \rangle = \langle |m_{stag}| \rangle = 0$, para valores de h y $|F|$ suficientemente pequeños. Sin embargo aparece una fase nueva para $|F|$ grande, en la que la magnetización *staggered* deja de ser nula. Esto es algo razonable, teniendo en cuenta que la configuración que favorecen los valores negativos de F es precisamente la de *tablero de ajedrez*, en la que m_{stag} es máxima. La principal diferencia entre el sector ferromagnético y el antiferromagnético es que, en el segundo caso, la transición entre sus fases no se suaviza con $h \neq 0$, como puede apreciarse en las figuras 10 y 9. Es decir, existe toda una curva de transición en el caso antiferro, de acuerdo con la literatura [12–16]. Precisamente para comparar con estas referencias, introducimos un cambio de variable en los parámetros del modelo:

$$T = \frac{1}{|F|}, \quad h' = \frac{h}{|F|}, \quad (49)$$

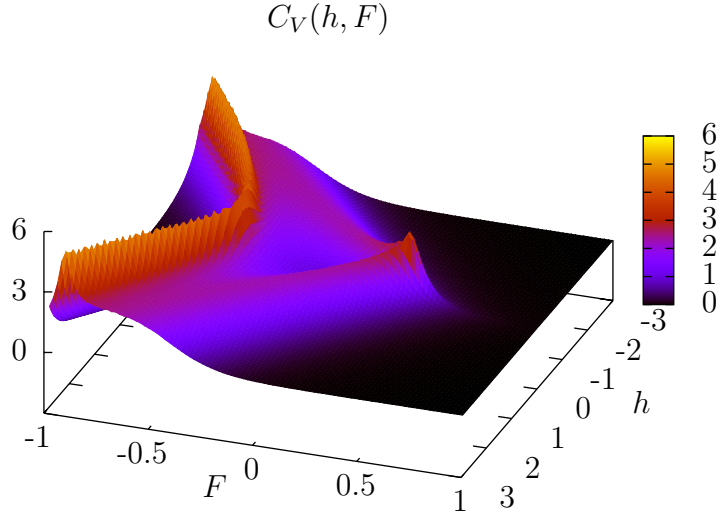


Figura 9: C_V en un retículo 16×16 . En la figura puede apreciarse cómo, mientras en el caso ferromagnético la transición se suaviza, en el antiferromagnético persiste para todos los valores de h .

de forma que T es la temperatura (definida como convencionalmente, pero en unidades de $1/k_B$) y h' queda desligado del acoplo y sólo regula la intensidad del campo. Empleando estas variables, se presentan en las figuras 11 y 12 las medidas de C_V y χ_{stag} en el sector antiferromagnético, junto con la curva teórica de [13] que localiza (de forma aproximada) la transición de fase en el límite termodinámico. Como vemos, el acuerdo entre las simulaciones y la curva es satisfactorio, dados los efectos de tamaño finito asociados a un retículo 16×16 .

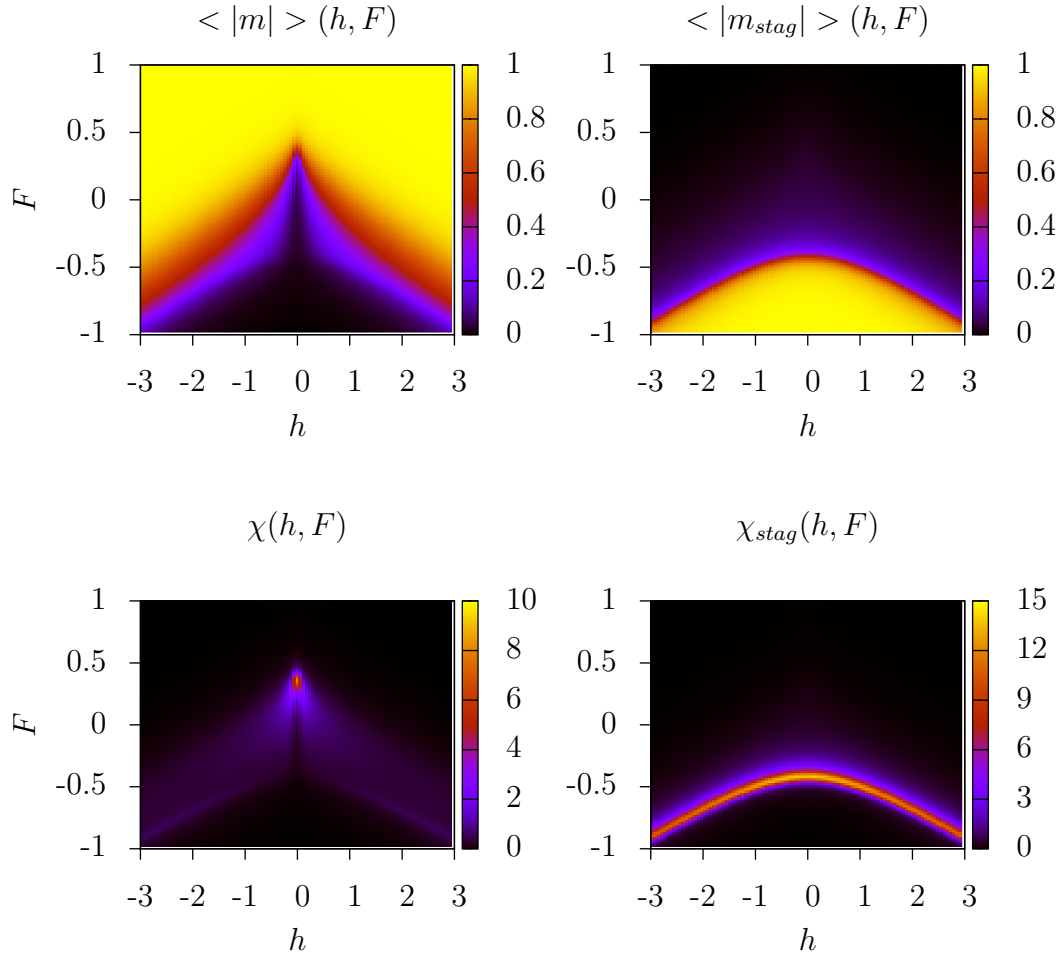


Figura 10: Magnetizaciones y susceptibilidades para un retículo 16×16 .

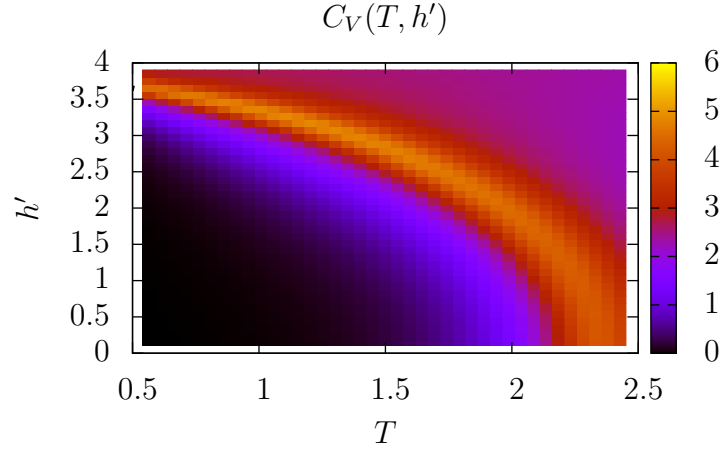


Figura 11: C_V en el sector antiferromagnético. Se presenta la curva teórica obtenida por Muller-Hartmann y Zittartz en [13] superpuesta a los resultados obtenidos con el algoritmo geométrico, en un tamaño de retículo 16×16 . Pese a ser un tamaño pequeño, vemos que el acuerdo es bueno.

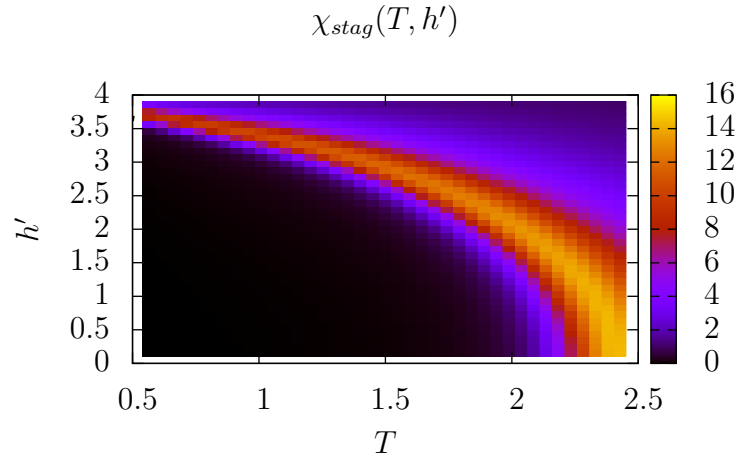


Figura 12: χ_{stag} en el sector antiferromagnético, también junto con la curva teórica de [13], en un tamaño de retículo 16×16 . El acuerdo es razonable, si bien la transición está más alejada que en el caso de C_V , presumiblemente por efectos de tamaño finito.

5. Conclusiones y perspectivas

Al comienzo de este trabajo, nos planteábamos el objetivo de desarrollar un algoritmo de simulación geométrico para el modelo Z_2 gauge-Higgs. Como hemos visto en la sección anterior, se han implementado con éxito tres algoritmos diferentes. En primer lugar el geométrico, basado en el algoritmo presentado por Azcoiti y colaboradores en [3], que ha probado ser notablemente eficiente, si bien padece de *critical slowing down* (*CSD*), por lo que para aplicarlo en regiones críticas es necesario quedarse en tamaños de retículo pequeños. En segundo lugar, se ha implementado el algoritmo original de Prokof'ev y Svistunov (PS) [2] para el caso de Ising sin campo magnético, incluyendo una variante propia que hemos denominado bicéfala y que ha probado ser más eficiente que la original y que la presentada por Wolff en [7]. Por último, partiendo de las ideas de Mercado y colaboradores en [5], se ha presentado un algoritmo híbrido, en el sentido de que emplea el mismo espacio de configuraciones que el geométrico, pero introduciendo defectos tal y como hace el algoritmo PS. Además de padecer de *CSD*, ha probado ser menos eficiente que el algoritmo geométrico.

Por otra parte, se han medido los valores esperados de diferentes observables en el modelo de Ising con campo magnético (dual a Z_2 gauge-Higgs para $d = 2$), para un amplio rango del espacio de parámetros (F, h) , incluyendo el sector antiferromagnético de este ($F < 0$). De esta forma, se ha corroborado la existencia de una línea de transición, en concordancia con resultados previos [12–16].

Tras haber comprobado que conseguir una generalización del algoritmo PS que no padezca *CSD* no es algo trivial, se plantea la pregunta de cuáles pueden ser los siguientes pasos de cara a lograr algoritmos que nos permitan estudiar modelos de altas energías, en regiones críticas y de forma eficiente. Una posible respuesta vendría de mano de las ideas presentadas en [24,25], en las que se generan las configuraciones mediante un proceso microcanónico, pesando cada una de ellas *a posteriori*. De este modo, se prescinde del *importance sampling*, obteniendo a cambio un conjunto de configuraciones común para los diferentes puntos del espacio de parámetros. Otra posibilidad, a medio camino entre este trabajo y las referencias citadas, sería introducir en las simulaciones un paso microcanónico, de forma que fijando magnitudes como el área o el perímetro, se pudiese disminuir la correlación estadística entre configuraciones, causante del *CSD*. Comprobar la eficacia en la práctica de ambas posibilidades será el objetivo de posteriores trabajos. Además, uno de los objetivos que nos planteábamos al inicio de este trabajo, estudiar en detalle la línea de transición del modelo de Ising antiferromagnético, podría hacerse factible de conseguir un algoritmo eficiente en regiones críticas.

Referencias

- [1] N. Prokof'ev, B. Svistunov and S. Tupitsyn, *Worm Algorithm in Quantum Monte Carlo Simulations*, *Phys. Lett. A* **238** (256) (1998).
- [2] N. Prokof'ev and B. Svistunov, *Worm Algorithms for Classical Statistical Models*, *Phys. Rev. Lett.* **87** (16) 160601 (2001).
- [3] V. Azcoiti, E. Follana, A. Vaquero, and G. Di Carlo, *Geometric algorithm for abelian-gauge models*, *JHEP* 0908 008 (2009).
- [4] C. Gattringer and A. Schmidt, *Gauge and matter fields as surfaces and loops: An exploratory lattice study of the $Z(3)$ gauge-Higgs model*, *Phys. Rev. D* **86** 094506 (2012).
- [5] Y. D. Mercado, C. Gattringer, and A. Schmidt, *Surface worm algorithm for abelian Gauge-Higgs systems on the lattice* *Comput. Phys. Commun.* **184** 1535 (2013).
- [6] Y. Deng, T. M. Garoni and A. D. Sokal, *Dynamic critical behavior of the worm algorithm for the Ising model*, *Phys. Rev. Lett.* **99** 110601 (2007).
- [7] U. Wolff, *Simulating the all-order strong coupling expansion I: Ising model demo*, *Nucl. Phys. B* **810** 491 (2009).
- [8] U. Wolff, *Monte Carlo errors with less errors*, *Comput. Phys. Commun.* **156** 143 (2004).
- [9] Matthias Troyer and U. J. Wiese, *Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations*, *Phys. Rev. Lett.* **94** 170201 (2005).
- [10] Y. D. Mercado, C. Gattringer, and A. Schmidt, *Dual Lattice Simulation of the Abelian Gauge-Higgs Model at Finite Density: An Exploratory Proof of Concept Study* *Phys. Rev. Lett.* **111** 141601 (2013).
- [11] V. Azcoiti, G. Cortese, E. Follana, M. Giordano, *A geometric Monte Carlo algorithm for the antiferromagnetic Ising model with "topological" term at $\theta = \pi$* , *Nuclear Physics B* **883** 656 (2014).
- [12] D. C. Rapaport and C. Domb, *The smoothness postulate and the Ising antiferromagnet*, *J. Phys. C* **4** 2684 (1971).
- [13] E. Muller-Hartmann and J. Zittartz, *Interface Free-Energy and Transition-Temperature of Square-Lattice Ising Antiferromagnet at Finite Magnetic-Field*, *Z. Phys. B* **27** 261 (1977).
- [14] X.-Z. Wang and J. S. Kim, *The Critical Line of an Ising Antiferromagnet on Square and Honeycomb Lattices*, *Phys. Rev. Lett.* **78** 413 (1997).

- [15] D. C. Rapaport, *Monte Carlo Study of the Phase Boundary of the Ising Antiferromagnet*, *Phys. Lett* **65 A** 147 (1978).
- [16] K. Binder and D. P. Landau, *Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions*, *Phys. Rev.* **B21** 1941 (1980).
- [17] F. J. Wegner, *Duality in Generalized Ising Models and Phase Transitions without Local Order Parameters*, *J. Math. Phys.* **12** 2259 (1971).
- [18] R. Balian, J. R. Drouffe and C. Itzykson, *Gauge Fields on a lattice. II. Gauge-invariant Ising model*, *Phys. Rev.* **D 11** 2098 (1975).
- [19] N. Metropolis et al, *Equation of State by Fast Computing Machines*, *J Chem. Phys.* **21** 6 1087 (1953).
- [20] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*, *Phys. Rev. Lett.* **58** 86 (1987).
- [21] N. Madras and A. D. Sokal, *The pivot algorithm: A highly efficient Monte Carlo method for the self-avoiding walk*, *J. Stat. Phys.* **50** 109 (1988).
- [22] B. Efron, *The Jackknife, the Bootstrap and Other Resampling Plans* (Society for Industrial and Applied Mathematics [SIAM], Philadelphia, 1982).
- [23] R.G. Miller, *The Jackknife—A review*, *Biometrika* **61** 1 (1974).
- [24] V. Azcoiti, G. Di Carlo, and A. F. Grillo, *New proposal for including dynamical fermions in lattice gauge theories: The compact-QED case*, *Phys. Rev. Lett* **65** 2239 (1990)
- [25] V. Azcoiti, V. Laliena, X. Q. Luo et al, *Microcanonical fermionic average method for Monte Carlo simulations of lattice gauge theories with dynamical fermions*, *Phys. Rev.* **D 48** 402 (1993)